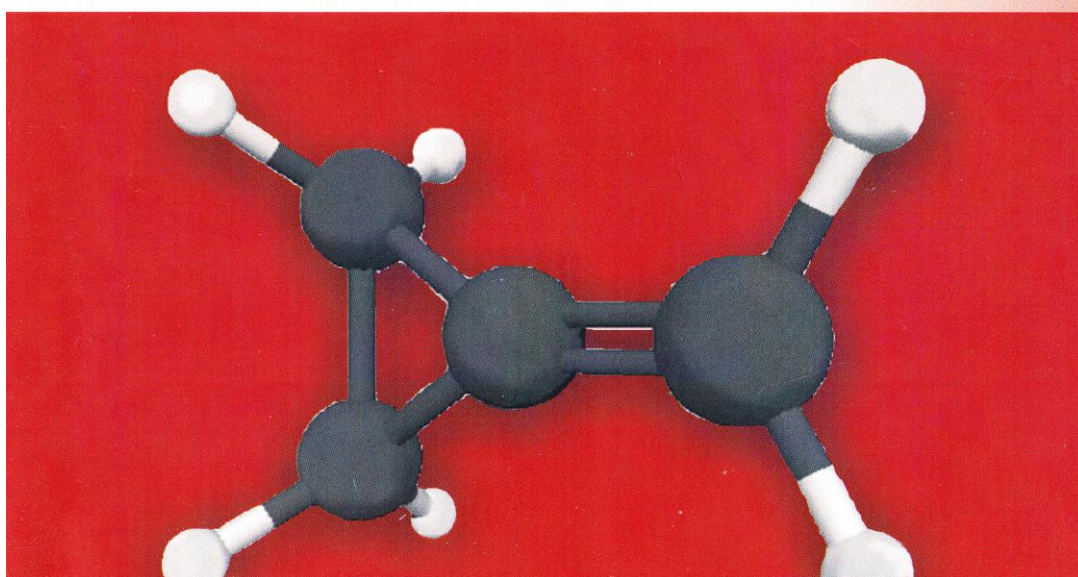


**В.А. Бабкин
Д.С. Андреев
Е.С. Титова
Ю.А. Сангалов
А.А. Денисов**

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ
АЛИЦИКЛИЧЕСКИХ ОЛЕФИНОВ
И ИХ ПРОИЗВОДНЫХ**



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
АРХИТЕКТУРНО-СТРОИТЕЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СЕБРЯКОВСКИЙ ФИЛИАЛ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**Квантово-химический расчет
лициклических олефинов и их производных**

Монография

Под общей редакцией

доктора химических наук, профессора В. А. Бабкина

Волгоград 2012



УДК 577.175

ББК 24.13

К32

Авторский коллектив:

доктор химических наук, профессор, академик
Международной академии наук «Контенант», заведующий лабораторией
«Компьютерное моделирование молекулярных систем» СФ ВолгГАСУ

В.А. Бабкин;

сотрудник СФ ВолгГАСУ **Д.С. Андреев;**

кандидат химических наук, доцент, ВГТУ, **Е.С. Титова;**

доктор химических наук, член-корреспондент Башкирской АН,
профессор, Институт нефтехимпереработки (г. Уфа), **Ю.А. Сангалов;**
кандидат сельскохозяйственных наук, доцент, СФ ВолгГАСУ, **А.А. Денисов**

Рецензенты:

кандидат химических наук, доцент **Г.А. Савин** (ВГСПУ);

кандидат химических наук, доцент **О.П. Бузинова** (ВГСПУ)

ISBN 978-5-9669-0965-9



- © Бабкин В.А., Андреев Д.С., Титова Е.С., Сангалов Ю.А.,
Денисов А.А., 2012
- © ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный
архитектурно-строительный университет».
Себряковский филиал, 2012
- © ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный
технический университет», 2012

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
Глава 1. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА.....	5
Глава 2. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ АЛИЦИКЛИЧЕСКИХ ОЛЕФИНОВ И ИХ ПРОИЗВОДНЫХ.....	6
2.1. Расчет методом АВ ІNІTІO.....	6
2.2. Расчет методом MNDO	48
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	93
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	94